

Mémoire d'initiation à la recherche: homotopie algorithmique

Léonie Papon, sous la direction de David Gontier

25 juin 2019

Dans un réseau cristallin, les états quantiques occupés par les électrons sont décrits par des ondes de Bloch. Pour comprendre certaines propriétés du cristal, notamment sa polarisation, il est utile de connaître les fonctions de Wannier des électrons, qui sont une combinaison de ces ondes de Bloch. Mathématiquement, via le théorème de Bloch, calculer une fonction de Wannier revient à trouver une frame périodique pour une famille de projecteurs eux-même périodiques et caractéristiques des atomes composant le cristal. Ce problème relève de la théorie de l'homotopie et si la topologie permet d'assurer ou non l'existence d'une homotopie entre deux fonctions, elle ne donne généralement pas la formule explicite de cette éventuelle homotopie. La systématisation du calcul d'une fonction de Wannier se rapporte ainsi à la question suivante : comment construire algorithmiquement une homotopie dans \mathcal{U}_m , espace qui apparaît naturellement lorsque l'on cherche une frame périodique pour une famille de projecteurs? Dans ce mémoire, est présenté un des algorithmes possibles, fondé sur la notion de transport parallèle.

Ce mémoire se compose de trois parties. La première partie est consacrée à des définitions générales autour de la notion d'homotopie, définitions illustrées par plusieurs exemples utiles pour la suite. Dans la deuxième partie, est donnée la définition d'une frame pour une famille de projecteurs et y est introduit le concept de transport parallèle. Enfin, la troisième partie présente, dans différents cas, la méthode algorithmique de construction d'une frame périodique.

1 Homotopie et contraction : définitions et premiers exemples

Dans cette première partie, on donne les définitions d'homotopie et de contraction illustrées par deux exemples qui serviront par la suite.

1.1 Définitions

Soient X et Y deux espaces topologiques. On note $I = [0, 1]$.

Définition 1.1. Soient $f, g : X \rightarrow Y$ deux fonctions continues. On dit que $F : X \times I \rightarrow Y$ est une homotopie entre f et g si F est continue sur $X \times I$ et si :

$$F(t, s = 0) = f(t) \quad \text{et} \quad F(t, s = 1) = g(t).$$

Définition 1.2. Soient $f : I \rightarrow X$ une fonction continue, p un point de X . On dit que $F : I \times I \rightarrow X$ est une contraction de f sur le point p si F est continue sur $I \times I$ et si :

$$F(t, s = 0) = f(t) \quad \text{et} \quad F(t, s = 1) = p.$$

1.2 La sphère \mathbb{S}^2

Soit $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{S}^2$ une fonction continue telle que $f(0) = f(1)$. Soit $p \in \mathbb{S}^2$ tel que pour tout t dans $[0, 1]$, $f(t) \neq -p$. Une contraction de f sur p est donnée par :

$$F(t, s) := \frac{(1-s)f(t) + sp}{\|(1-s)f(t) + sp\|}.$$

En effet, F est bien continue, le dénominateur ne s'annule pas et $F(t, 0) = f(t)$, $F(t, 1) = p$. De plus, pour tout $(t, s) \in [0, 1]^2$, $F(t, s) \in \mathbb{S}^2$.

La figure 1 illustre cette contraction. On a généré aléatoirement une fonction f continue de $[0, 1]$ dans \mathbb{S}^2 telle que $f(0) = f(1)$, en rouge sur la figure, que l'on cherche à contracter sur le point rouge p . Sont ensuite représentées les fonctions $F(t, \frac{k}{5})$ pour k dans $\{1, \dots, 4\}$: $F(t, \frac{1}{5})$ est en bleu, $F(t, \frac{2}{5})$ en orange, $F(t, \frac{3}{5})$ en vert et enfin $F(t, \frac{4}{5})$ en rose.

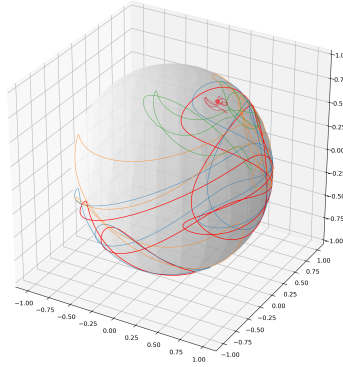


FIGURE 1 – Contraction sur un point d'une fonction aléatoire (en rouge) de \mathbb{S}^2

1.3 Le nombre d'enroulements

On s'intéresse ici à la contraction d'une fonction $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{C}^*$ de classe \mathcal{C}^1 . Pour alléger les notations, on écrit $f(t)$ où $t \in [0, 2\pi]$ pour $f(\cos(t), \sin(t))$. On suppose de plus $f(0) = f(2\pi)$.

Définition 1.3. Le nombre d'enroulements (ou winding number) de f est défini par :

$$W(f) = \frac{1}{2i\pi} \int_0^{2\pi} \frac{f'(t)}{f(t)} dt.$$

C'est le nombre de tours autour de 0 que f fait en une période.

Remarque 1.4. On peut écrire $f(t)$ sous la forme $f(t) = |f(t)| \exp(i\theta(t))$. On a alors :

$$W(f) = \frac{1}{2\pi} (\theta(2\pi) - \theta(0)).$$

En effet :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} (\theta(2\pi) - \theta(0)) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \theta'(t) dt = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\operatorname{Im}(\bar{f}(t)f'(t))}{\bar{f}(t)f(t)} dt \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \operatorname{Re}\left(\frac{1}{i} \frac{f'(t)}{f(t)}\right) dt = \operatorname{Re}\left(\frac{1}{2i\pi} \int_0^{2\pi} \frac{f'(t)}{f(t)} dt\right) \\ &= [\ln(|f(t)|)]_0^{2\pi} + \frac{1}{2i\pi} \int_0^{2\pi} \frac{f'(t)}{f(t)} dt = \frac{1}{2i\pi} \int_0^{2\pi} \frac{f'(t)}{f(t)} dt. \end{aligned}$$

Remarque 1.5. Comme f est 2π -périodique, $\theta(2\pi) = \theta(0) + 2k\pi$, $k \in \mathbb{Z}$. D'après la remarque précédente, on a donc :

$$W(f) \in \mathbb{Z}.$$

Lemme 1.6. Soient $f, g : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{C}^*$ de classe \mathcal{C}^1 .

Il existe une homotopie entre f et g si et seulement si $W(f) = W(g)$.

Démonstration. sens direct : soit $F : \mathbb{S}^1 \times I \rightarrow \mathbb{C}^*$ une homotopie entre f et g .

La fonction

$$W : s \in [0, 1] \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial_t F(t, s)}{F(t, s)} dt$$

est continue et va de $[0, 1]$ dans \mathbb{Z} , elle est donc constante. On a alors :

$$W(0) = W(1)$$

c'est-à-dire :

$$W(f) = W(g).$$

sens indirect : supposons $W(f) = W(g)$.

Pour tout t dans \mathbb{S}^1 , on écrit f et g sous la forme $f(t) = r(t) \exp(i\theta(t))$ et $g(t) = R(t) \exp(i\phi(t))$ avec R, r, θ et ϕ continues. On définit alors sur $\mathbb{S}^1 \times [0, 1]$ l'homotopie suivante :

$$F(t, s) := ((1-s)r(t) + sR(t)) \exp(i((1-s)\theta(t) + s\phi(t))).$$

Comme $W(f) = W(g)$, $\frac{1}{2\pi}(\theta(2\pi) - \theta(0)) = \frac{1}{2\pi}(\phi(2\pi) - \phi(0))$. Donc F est bien continue sur $\mathbb{S}^1 \times [0, 1]$ et $F(t, 0) = f(t)$, $F(t, 1) = g(t)$. \square

Corollaire 1.7. Soit $f : \mathbb{S}^1 \rightarrow \mathbb{C}^*$ de classe \mathcal{C}^1 .

f peut se contracter au point $1 \in \mathbb{C}^*$ si et seulement si $W(f) = 0$.

Démonstration. Le winding number de la fonction constante égale à 1 vaut 0. Le lemme 1.6 nous donne le résultat. \square

Exemple 1.8. On génère une fonction aléatoire f continue de $[0, 1]$ dans \mathbb{C}^* , représentée figure 2. Le point orange est le point $(0, 0)$: on cherche à compter le nombre de tours que fait f autour de ce point. La figure (a) est le graphe de son argument $\theta(t)$. Cet argument est défini modulo 2π , ce qui ne permet pas de calculer facilement le winding number de f : on voit sur la figure des "sauts" qui correspondent aux moments où la fonction achève un tour autour de $(0, 0)$ (dans le sens horaire ou anti-horaire). Un tour dans le sens anti-horaire fait augmenter son winding number de 1, un tour dans le sens horaire le fait diminuer de -1. Sur la figure (b), est représenté le graphe lissé de θ . On peut alors directement calculer le winding number de f en faisant la différence entre la valeur $\theta(1000)$ (qui correspond à $\theta(2\pi)$) et $\theta(0)$ et en divisant cette différence par π . Ici, il vaut -4.

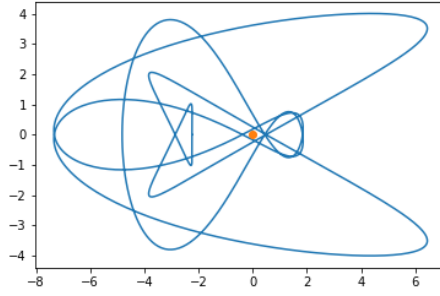
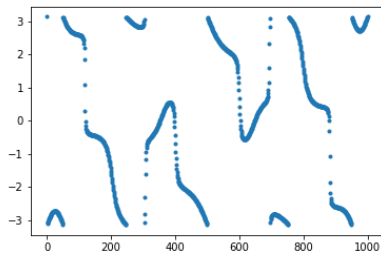
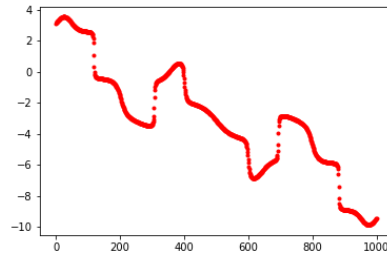


FIGURE 2 – Graphe de f : en abscisse, est représenté $Re(f)$ et en ordonnée, $Im(f)$



(a) Graphe de $\theta(t)$



(b) Graphe lissé de $\theta(t)$

2 Frame et transport parallèle

On introduit dans cette deuxième partie la notion de frame pour un projecteur. On présente ensuite le transport parallèle, qui permet de conserver la structure de frame dans le cas de projecteurs dérivables. Ce théorème sera au coeur de notre méthode de construction algorithmique de frames périodiques.

2.1 La notion de frame

Définition 2.1. Soit $P \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$ un projecteur de rang $m \leq d$.

On dit que $U \in \mathcal{M}_{d \times m}(\mathbb{C})$ est une frame pour P si :

$$P = UU^* \quad \text{et} \quad U^*U = \mathbb{I}_m.$$

Lemme 2.2. Soit $P \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$ un projecteur.

$U \in \mathcal{M}_{d \times m}(\mathbb{C})$ est une frame pour P si et seulement $U^*PU = \mathbb{I}_m$ et $U^*U = \mathbb{I}_m$.

Démonstration. sens direct : supposons que U soit une frame pour P .

$$P = UU^* \Leftrightarrow U^T P U = U^T U U^T U.$$

Or $UU^* = \mathbb{I}_m$ car U est une frame pour P . Donc $U^*PU = \mathbb{I}_m$.

sens indirect : supposons $U^*PU = \mathbb{I}_m$ et $U^*U = \mathbb{I}_m$. Montrons que $P = UU^*$.

On a : $U^*(UU^*)U = (U^*U)(U^*U) = \mathbb{I}_m$. D'où $U^*(UU^* - P)U = 0$.

De plus, comme P est un projecteur, on a pour tout entier k , $P^k = P$, d'où $U^*(UU^* - P^k)U = 0$. Donc $P = UU^*$. \square

Exemple 2.3. Soit $P : t \in \mathbb{S}^1 \rightarrow P(t) \in \mathcal{M}_d(\mathbb{R})$ une fonction continue telle que pour tout t dans \mathbb{S}^1 , $P(t)$ est un projecteur. On peut se poser la question suivante : existe-t-il une frame $U(t)$ telle que $\forall t \in \mathbb{S}^1$, $P(t) = U(t)U^T(t)$? La réponse est non, une telle frame n'existe pas toujours : un contre-exemple est le ruban de Mobius (voir plus tard).

2.2 Le transport parallèle

Soit $P : t \in [0, 1] \rightarrow P(t) \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$ une fonction continue telle que pour tout t dans $[0, 1]$, $P(t)$ est un projecteur de rang $m \leq d$. On cherche dans cette section à construire, si elle existe, une frame U pour P .

Commençons par un peu d'histoire. Dans les années 1910, le mathématicien italien Tullio Levi-Civita s'intéresse à la notion de parallélisme sur des espaces de plusieurs dimensions. Son objectif est notamment d'améliorer le formalisme de la physique quantique, qui voit à peine le jour. En 1917, il propose le concept de transport parallèle, tout de suite adopté par la communauté scientifique car il permet de faire avancer à la fois les théories physiques et la géométrie différentielle. C'est ce concept que nous allons utiliser pour la construction de frames. Dans le cas où U_0 est une frame pour $P(0)$, il consiste à résoudre le système ci-dessous :

$$\begin{cases} \dot{U}(t) = [\dot{P}(t), P(t)]U(t) \\ U(0) = U_0 \end{cases} \quad (1)$$

On a alors le théorème suivant :

Théorème 2.4. *Si U_0 est une frame pour $P(0)$, alors la solution $U(t)$ de (1) est une frame pour $P(t)$ pour tout t .*

Démonstration. Supposons que U_0 soit une frame pour $P(0)$. Soit U la solution de (1). Montrons d'abord que pour tout t dans $[0, 1]$, $U^*(t)U(t) = \mathbb{I}_m$. On a : $\dot{U} = (\dot{P}P - P\dot{P})U$ et $\dot{U}^* = U^*(P\dot{P} - \dot{P}P)$. On a alors :

$$\partial_t(U^*U) = \dot{U}^*U + U^*\dot{U} = U^*[P\dot{P} - \dot{P}P]U + U^*[\dot{P}P - P\dot{P}]U = 0$$

d'où :

$$\forall t \in [0, 1], \quad U^*(t)U(t) = U^*(0)U(0).$$

Comme $U(0)$ est une frame pour $P(0)$, $U^*(0)U(0) = \mathbb{I}_m$ et donc :

$$\forall t \in [0, 1], \quad U^*(t)U(t) = \mathbb{I}_m.$$

Montrons maintenant que pour tout t dans $[0, 1]$, $U(t)U^*(t) = P(t)$. D'après le lemme 2.2, cela est équivalent à montrer : $\forall t \in [0, 1], U^*(t)P(t)U(t) = \mathbb{I}_m$.

Comme $\forall t \in [0, 1], P^2(t) = P(t)$, en dérivant, on obtient : $\forall t \in [0, 1], \dot{P}(t)P(t) + P(t)\dot{P}(t) = \dot{P}(t)$. On a alors pour tout t dans $[0, 1]$, $P(t)\dot{P}(t)P(t) + P(t)\dot{P}(t)P(t) = P(t)\dot{P}(t)P(t)$, ou encore $P(t)\dot{P}(t)P(t) = 0$.

Calculons maintenant $\partial_t(U^*PU)$.

$$\begin{aligned} \partial_t(U^*PU) &= \dot{U}^*PU + U^*\dot{P}U + U^*P\dot{U} = U^*[(P\dot{P} - \dot{P}P)P + \dot{P} + P(\dot{P}P - P\dot{P})]U \\ &= U^*[P\dot{P}P - \dot{P}P + \dot{P} + P\dot{P}P - P\dot{P}] = U^*[P\dot{P}P - \dot{P}P + \dot{P} + P\dot{P}P - P\dot{P}]U \\ &= 0 \end{aligned}$$

D'où :

$$\forall t \in [0, 1], U^*(t)P(t)U(t) = U^*(0)P(0)U(0).$$

Comme $U(0)$ est une frame pour $P(0)$, $U^*(0)P(0)U(0) = \mathbb{I}_m$ et donc :

$$\forall t \in [0, 1], U^*(t)P(t)U(t) = \mathbb{I}_m.$$

□

Algorithmiquement, si on dispose de $P(t_i)$ avec $i \in \{0, \dots, N\}$ et $0 = t_0 \leq t_1 \leq \dots \leq t_N = 1$, le transport parallèle se discrétise de la façon suivante :

$$\begin{cases} \tilde{U}_{t_{i+1}} = P(t_{i+1})U_{t_i} \\ U_{t_{i+1}} = \tilde{U}_{t_{i+1}}[\tilde{U}_{t_{i+1}}^* \tilde{U}_{t_{i+1}}]^{-\frac{1}{2}} \end{cases}$$

En effet, on a vu dans la démonstration du théorème 2.4 que pour tout t dans $[0, 1]$, $P(t)\dot{P}(t)P(t) = 0$. Ainsi, l'égalité $\dot{U}(t) = [\dot{P}(t), P(t)]U(t)$ dans (1) se simplifie :

$$\dot{U}(t) = \dot{P}(t)P(t)u(t) - P(t)\dot{P}(t)u(t) = \dot{P}(t)u(t) - P(t)\dot{P}(t)P(t)u(t) = \dot{P}(t)u(t).$$

La discrétisation proposée est donc bien convergente, au sens où si $\sup_i t_{i+1} - t_i$ tend vers 0, alors U_{t_i} tend vers $U(t_i)$. C'est dans cette discrétisation que réside un des avantages du transport parallèle : il est facile d'en calculer numériquement une approximation.

3 Construction de frames périodiques

On présente dans cette partie des méthodes algorithmiques de construction d'une frame périodique pour des projecteurs eux-mêmes périodiques. Cela va nous amener à construire de manière explicite des contractions. On distingue différents cas, selon que les projecteurs dépendent d'une, de deux ou de trois variables.

3.1 Construction d'une frame périodique en dimension 1

3.1.1 Le cas réel

Soit $P : t \in [0, 1] \rightarrow P(t) \in \mathcal{M}_d(\mathbb{R})$ une fonction continue telle que pour t dans $[0, 1]$, $P(t)$ est un projecteur de rang $m \leq d$ et $P(0) = P(1)$.

On vient de voir que si U_0 est une frame pour $P(0)$, alors $U(t)$ solution de (1) est une frame pour $P(t)$. Cependant, même si $P(0) = P(1)$, c'est-à-dire même si P est périodique, on n'a pas forcément $U(0) = U(1)$. Dans cette section, on cherche donc à donner des conditions pour qu'il y ait existence d'une frame périodique pour P , c'est-à-dire d'une frame \tilde{U} telle que $\tilde{U}(0) = \tilde{U}(1)$.

Soit U la solution de (1). On commence par remarquer que $U(0)$ et $U(1)$ sont deux bases de $\text{Ran}(P(0))$ qui est de dimension m . Il existe donc une matrice d'obstruction V_{obs} appartenant à $\mathcal{O}_m(\mathbb{R})$ telle que :

$$U(1) = U(0)V_{obs}.$$

On a alors le théorème suivant :

Théorème 3.1. *Il existe une frame périodique pour $P(t)$ si et seulement si $\det(V_{obs}) = 1$.*

Démonstration. sens indirect : supposons $\det(V_{obs}) = 1$.

Alors il existe $L \in \mathcal{A}_m(\mathbb{R})$ telle que $V_{obs} = \exp(L)$.

Ainsi, on a : $V_{obs}^T V_{obs} = \exp(L^T) \exp(L) = \exp(-L) \exp(L) = \mathbb{I}_m$.

On pose la contraction suivante :

$$\forall t \in [0, 1], V(t) = \exp(tL).$$

Cette contraction vérifie :

$$\forall t \in [0, 1], \quad V(t) \in \mathcal{O}_m(\mathbb{R}), V(0) = \mathbb{I}_m \quad \text{et} \quad V(1) = V_{obs}.$$

Pour U solution de (1), on définit alors \tilde{U} par :

$$\forall t \in [0, 1], \quad \tilde{U}(t) = U(t)V(1-t).$$

Montrons que $\tilde{U}(t)$ est une frame périodique pour $P(t)$.

On a d'une part, pour tout t dans $[0, 1]$:

$$\begin{aligned} \tilde{U}^T(t)\tilde{U}(t) &= V^T(1-t)U^T(t)U(t)V(1-t) \\ &= V^T(1-t)V(1-t) \text{ car } U^T(t)U(t) = \mathbb{I}_m \\ &= \mathbb{I}_m \text{ car } V(1-t) \in \mathcal{O}_m \end{aligned}$$

D'autre part, on a, pour tout t dans $[0, 1]$:

$$\begin{aligned} \tilde{U}(t)\tilde{U}^T(t) &= U(t)V(1-t)V^T(1-t)U^T(t) \\ &= U(t)U^T(t) \text{ car } V(1-t)V^T(1-t) = \mathbb{I}_m \\ &= P(t) \end{aligned}$$

Enfin, $\tilde{U}(1) = U(1)V(0) = U(1) = U(0)V_{obs} = U(0)V(1) = \tilde{U}(0)$. Donc $\tilde{U}(t)$ est bien une frame périodique pour $P(t)$.

sens direct : supposons $\det(V_{obs}) = -1$.

On suppose par l'absurde qu'il existe une frame périodique $\tilde{U}(t)$ pour $P(t)$.

Alors $\tilde{U}(t)$ est de la forme $\tilde{U}(t) = U(t)\tilde{V}(t)$ avec \tilde{V} continue et telle que pour tout t dans $[0, 1]$, $\tilde{V}(t)$ est dans $\mathcal{O}_m(\mathbb{R})$, $\tilde{V}(0) = \mathbb{I}_m$ et $\tilde{V}(1) = V_{obs}$.

On a alors pour tout t dans $[0, 1]$, $\det(\tilde{V}(t)) \in \{-1, 1\}$. Comme $\det(\tilde{V}(t))$ est continue, $\det(\tilde{V}(t))$ est donc constant.

Or $\det(\tilde{V}(0)) = 1$ et $\det(\tilde{V}(1)) = \det(V_{obs}) = -1$, ce qui est absurde. Donc si $\det(V_{obs}) \neq 1$, il n'existe pas de frame périodique pour $P(t)$. \square

Exemple 3.2. Revenons sur le ruban de Mobius. On définit sur $[0, 1]$ la fonction projecteur P suivante :

$$P(t) = \begin{pmatrix} \cos^2(\pi t) & \sin(\pi t) \cos(\pi t) \\ \sin(\pi t) \cos(\pi t) & \sin^2(\pi t) \end{pmatrix}$$

C'est la projection sur $u(t) = (\cos(\pi t), \sin(\pi t))$. P est réelle et 1-périodique. De plus, pour tout t dans $[0, 1]$:

$$P(t) = u(t)u(t)^T \quad \text{et} \quad u(t)^T u(t) = 1.$$

Ainsi, u est une frame pour P . On remarque que $u(0)^T u(1) = -1$. Donc il n'existe pas de frame périodique pour P .

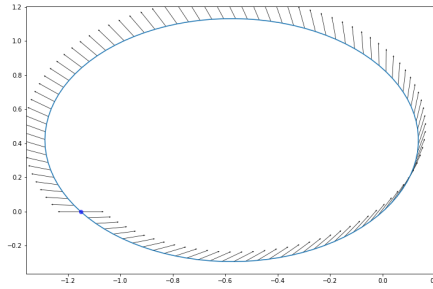
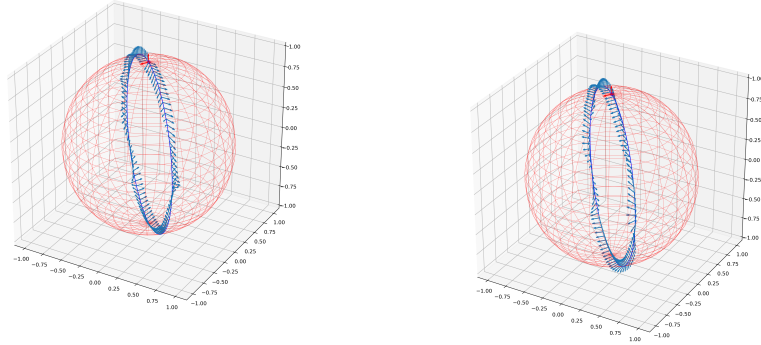


FIGURE 4 – Transport parallèle de $u(0)$ et construction d'une frame pour $P(t)$

Ceci s'illustre sur la figure 6. Le point bleu correspond à $P(0)v = P(1)v$ où v est un vecteur aléatoire de \mathbb{R}^2 . Les flèches représentent les vecteurs $u(t)$ pour t dans $[0, 1]$. On remarque que les vecteurs $u(0)$ et $u(1)$, c'est-à-dire les vecteurs ayant pour origine le point bleu, sont colinéaires de sens contraire : on comprend visuellement pourquoi il ne peut y avoir de frame périodique pour P .

Exemple 3.3. On génère aléatoirement une fonction $t \in [0, 1] \rightarrow P(t) \in \mathcal{M}_3(\mathbb{R})$ telle que pour tout t dans $[0, 1]$, $P(t)$ est un projecteur de rang 2. On calcule la matrice d'obstruction V_{obs} . Ici, on est dans un cas où le déterminant de V_{obs} vaut 1, la construction d'une frame périodique pour P est possible.



(a) Transport parallèle d'une frame pour $P(0)$

(b) Frame périodique pour P

Les flèches rouges sur chacune des deux figures correspondent à la frame pour $P(0)$. Les flèches bleues sont quant à elles les frames pour $P(t)$, pour t entre 0 et 1. On remarque ainsi que le transport parallèle ne permet pas de construire une frame périodique (figure (a)), contrairement à l'algorithme proposé grâce auquel la figure (b) a été obtenue. En effet, sur la figure (a), au niveau du point bleu, on observe que les flèches bleues correspondant à la frame pour $P(1)$ ne coïncident pas avec les flèches rouges. Cette différence n'est plus présente sur la figure (b) : les deux frames coïncident.

3.1.2 Le cas complexe

On considère maintenant $P : t \in [0, 1] \rightarrow P(t) \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$ une fonction continue telle que pour tout t dans $[0, 1]$, $P(t)$ est un projecteur de rang $m \leq d$ et $P(0) = P(1)$. Dans ce cas, contrairement au cas réel, il existe toujours une frame périodique pour $P(t)$.

Soit U solution de (1). Comme précédemment, on commence par remarquer que $U(0)$ et $U(1)$ sont deux bases de $\text{Ran}(P(0))$. Il existe donc une matrice d'obstruction V_{obs} telle que :

$$U(1) = U(0)V_{obs}.$$

Dans le cas complexe, V_{obs} appartient à \mathcal{U}_m et \mathcal{U}_m est connexe.

Comme V_{obs} appartient à \mathcal{U}_m , il existe une matrice L de $\mathcal{M}_m(\mathbb{C})$ anti-hermitienne telle que $V_{obs} = \exp(L)$. On peut alors définir la frame périodique suivante :

$$\forall t \in [0, 1], \quad \tilde{U}(t) = U(t) \exp(-tL).$$

La fonction $t \rightarrow \tilde{U}(t)$ est continue par construction. De plus, on a bien $\tilde{U}(0) = \tilde{U}(1)$.

3.2 Construction d'une frame périodique en dimension 2

On cherche maintenant à construire une frame périodique pour une famille périodique de projecteurs dépendant de deux variables. Ainsi, soit $P : (k_1, k_2) \in [0, 1]^2 \rightarrow P(k_1, k_2) \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$ une fonction continue telle que pour tout (k_1, k_2) dans $[0, 1]^2$, $P(k_1, k_2)$ est un projecteur de rang $m \leq d$ et $P(0, 0) = P(0, 1)$, $P(0, 0) = P(1, 0)$. Nous allons établir une condition nécessaire et suffisante à la construction d'une frame périodique pour $(k_1, k_2) \in [0, 1]^2 \rightarrow P(k_1, k_2)$. Cela va nous conduire à mettre en oeuvre une méthode algorithmique de construction d'une homotopie dans \mathcal{U}_m .

Etape 1 : on commence par construire une frame sur $[0, 1] \times \{0\}$ de la même manière qu'en dimension 1. On obtient alors une frame périodique $U(k_1, 0)$ pour $k_1 \in [0, 1] \rightarrow P(k_1, 0)$.

Etape 2 : pour chaque k_1 dans $[0, 1]$, on utilise le transport parallèle pour obtenir une frame $U(k_1, k_2)$ pour $k_2 \in [0, 1] \rightarrow P(k_1, k_2)$. On obtient ainsi une frame $U(k_1, k_2)$ pour $(k_1, k_2) \in [0, 1]^2 \rightarrow P(k_1, k_2)$. Cette frame est bien continue mais il se peut qu'elle ne soit pas périodique en k_2 : pour tout k_1 dans $[0, 1]$, il existe $V_{obs}(k_1)$ telle que :

$$U(k_1, 1) = U(k_1, 0)V_{obs}(k_1).$$

Comme $U(k_1, 1)$ et $U(k_1, 0)$ sont deux bases de $Ran(P(k_1, 0))$, $V_{obs}(k_1) \in \mathcal{U}_m$. De plus, $U(1, 0) = U(0, 0)$ et $U(1, 1) = U(0, 1)$, d'où $V_{obs}(0) = V_{obs}(1)$. Ainsi, $k_1 \in [0, 1] \rightarrow V_{obs}(k_1)$ est une fonction continue périodique.

Etape 3 : on cherche maintenant, si elle existe, une homotopie entre $V_{obs}(\cdot)$ et \mathbb{I}_m . On s'appuie pour cela sur le résultat suivant :

Théorème 3.4. *Soit $V : k \in [0, 1] \rightarrow V(k) \in \mathcal{U}_m$ une fonction continue telle que $V(0) = V(1)$. Les propositions suivantes sont équivalentes :*

1. *Le winding number du déterminant de V est nul, c'est-à-dire :*

$$W(\det V) = \frac{1}{2i\pi} \int_0^1 \frac{1}{\det(V(k))} \det(V(k))' dk = 0.$$

2. *Il existe une homotopie entre $V(\cdot)$ et \mathbb{I}_m , c'est-à-dire une fonction continue $(k, t) \in [0, 1]^2 \rightarrow V(k, t) \in \mathcal{U}_m$ telle que :*

$$\forall k \in [0, 1], \quad V(k, 0) = V(k) \quad \text{et} \quad V(k, 1) = \mathbb{I}_m.$$

Démonstration. On donne ici les grandes lignes de la démonstration, la preuve complète est donnée dans [2]. On se place dans le cadre de la construction de la frame, c'est-à-dire $V = V_{obs}$.

Comme on cherche à construire explicitement une frame périodique pour P , on aimerait une preuve constructive de ce théorème, c'est-à-dire une contraction explicite de V_{obs} sur \mathbb{I}_m . On commence par écrire $V_{obs}(k_1)$ sous la forme :

$$V_{obs}(k_1) = \begin{pmatrix} \vdots & & \vdots \\ v_1(k_1) & \dots & v_m(k_1) \\ \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

où les $v_j(k_1)$ sont orthogonaux et de norme 1.

On peut commencer par chercher à contracter le premier vecteur colonne $v_1(k_1)$ de V_{obs} . On a :

$$|v_{1,1}(k_1)|^2 + |v_{1,2}(k_1)|^2 + \dots + |v_{1,m}(k_1)|^2 = 1$$

$$\iff \operatorname{Re}(v_{1,1}(k_1))^2 + \operatorname{Im}(v_{1,1}(k_1))^2 + \dots + \operatorname{Re}(v_{1,m}(k_1))^2 + \operatorname{Im}(v_{1,m}(k_1))^2 = 1$$

Ainsi, en tant que vecteur dans \mathbb{R} , $v_1(k_1) \in \mathbb{S}^{2m-1}$. On peut donc contracter $k_1 \rightarrow v_1(k_1)$ sur le vecteur w_1 de \mathbb{C}^m dont toutes les coordonnées sont nulles sauf la première qui vaut 1 si et seulement si $2m - 1 > 1$, c'est-à-dire si et seulement si $m > 1$. En effet, pour $m > 1$, contracter une fonction de $[0, 1]$ dans \mathbb{S}^{2m-1} sur un vecteur de \mathbb{S}^{2m-1} se ramène au cas traité en 1.2. Pour préserver l'orthonormalité des $v_j(k_1)$, on utilise le transport parallèle. On définit pour cela les projecteurs suivants :

$$\forall (k_1, t) \in [0, 1], \quad P_1(k_1, t) = \mathbb{I}_m - \tilde{v}_1(k_1, t)\tilde{v}_1^*(k_1, t)$$

où $(k_1, t) \rightarrow \tilde{v}_1(k_1, t)$ est la contraction de $v_1(k_1)$ sur w_1 .

On applique alors le transport parallèle à $(v_2(k_1), \dots, v_m(k_1))$ par rapport à ces projecteurs. Comme le transport parallèle préserve l'orthonormalité des vecteurs, on obtient une matrice de la forme :

$$\tilde{V}_{obs}(k_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \tilde{v}_2(k_1) & \dots & \tilde{v}_m(k_1) \\ 0 & \vdots & & \vdots \end{pmatrix}.$$

On peut ainsi contracter les $m - 1$ premiers vecteurs colonnes de $V_{obs}(k_1)$ un par un. A la jème étape, on contracte le vecteur $v_j(k_1)$ (qui a été modifié par les applications successives du transport parallèle) sur le vecteur de \mathbb{C}^m dont toutes les coordonnées sont nulles sauf la jème qui vaut 1. Cette contraction est possible car $v_j(k_1)$ peut être vu comme un vecteur de $\mathbb{S}^{2(m-j)-1}$. On applique ensuite le transport parallèle à $(v_{j+1}(k_1), \dots, v_m(k_1))$ par rapport aux projecteurs suivants :

$$\forall (k_1, t) \in [0, 1]^2, \quad P_j(k_1, t) = \mathbb{I}_m - \sum_{k=1}^j \tilde{v}_k(k_1, t)\tilde{v}_k^*(k_1, t).$$

où $(k_1, t) \rightarrow \tilde{v}_k(k_1, t)$ est la contraction du kème vecteur colonne (qui a été modifié par les application successives du transport parallèle) sur le vecteur de \mathbb{C}^m dont toutes les coordonnées sont nulles sauf la kème qui vaut 1.

Ainsi, après avoir contracté les $m - 1$ premiers vecteurs colonnes de $V_{obs}(k_1)$ et appliquer le transport parallèle avec les projecteurs définis ci-dessus à chaque étape, on obtient finalement une matrice de la forme :

$$\tilde{V}(k_1) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & \exp(i\phi(k_1)) \end{pmatrix}.$$

La fonction $k_1 \in [0, 1] \rightarrow \exp(i\phi(k_1)) \in \mathbb{C} \setminus \{0\}$ est périodique et continue. D'après le corollaire 1.7, elle peut se contracter au point $1 \in \mathbb{C}$ si et seulement si $W(\exp(i\phi(\cdot))) = 0$. Or, $W(\exp(i\phi(\cdot))) = W(\det(V_{obs}(\cdot)))$.

En effet, par périodicité, il existe $m \in \mathbb{Z}$ tel que $\phi(1) = \phi(0) + 2\pi m$ et $m = W(\exp(i\phi(\cdot)))$ d'après la remarque 1.5. On définit alors sur $[0; 1]^2$ l'homotopie suivante :

$$\tilde{V}(k_1, t) := (\tilde{v}_1(k_1, t), \dots, \tilde{v}_{m-1}(k_1, t), \tilde{v}_m(k_1, t)).$$

Pour j dans $\{1, \dots, m - 1\}$, comme précédemment, $(k_1, t) \in [0, 1]^2 \rightarrow \tilde{v}_j(k_1, t)$ correspond à la contraction de $v_j(k_1)$ (qui a été modifié par les applications successives du transport

parallèle) sur le vecteur de \mathbb{C}^m dont toutes les coordonnées sont nulles sauf la jème qui vaut 1. $(k_1, t) \in [0, 1]^2 \rightarrow \tilde{v}_m(k_1, t)$ correspond à la contraction de $v_m(k_1)$ sur le vecteur de \mathbb{C}^m dont toutes les coordonnées sont nulles sauf la dernière qui est la fonction $k_1 \rightarrow \exp(i\phi(k_1))$. On a alors :

$$m = \frac{1}{2\pi}(\phi(1) - \phi(0)) = \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \phi'(k_1) dk_1 = \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \left\langle \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \exp(i\phi(k_1)) \end{pmatrix}, \frac{d}{dk_1} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \exp(i\phi(k_1)) \end{pmatrix} \right\rangle dk_1.$$

On remarque que :

$$\left\langle \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \exp(i\phi(k_1)) \end{pmatrix}, \frac{d}{dk_1} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \exp(i\phi(k_1)) \end{pmatrix} \right\rangle = \text{Tr} \left(\tilde{V}(k_1, 1)^* \frac{d}{dk_1} \tilde{V}(k_1, 1) \right).$$

Ainsi, on obtient :

$$m = \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \text{Tr} \left(\tilde{V}(k_1, 1)^* \frac{d}{dk_1} \tilde{V}(k_1, 1) \right) dk_1 = W(\det \tilde{V}(\cdot, 1)).$$

De plus, $\tilde{V}(k_1, 0) = V_{obs}(k_1)$, c'est-à-dire que $\tilde{V}(\cdot, 1)$ a été obtenue par une déformation continue de $V_{obs}(\cdot)$. Ainsi, $W(\det \tilde{V}(\cdot, 1)) = W(\det V_{obs}(\cdot))$. On a donc bien :

$$W(\exp(i\phi(\cdot))) = W(\det V_{obs}(\cdot)).$$

Cela permet de conclure qu'il existe une frame périodique pour P si et seulement si $W(\det(V_{obs}(\cdot))) = 0$. \square

Remarque 3.5. On peut de plus montrer que (voir en annexe et [3]) :

$$W(\exp(i\phi(\cdot))) = W(\det(V_{obs}(\cdot))) = Ch(P, \mathbb{T}^2)$$

où $Ch(P, \mathbb{T}^2) := \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} \text{Tr}(PdP \wedge dP)$ est le nombre de Chern de P .

Cette l'égalité montre que la valeur de $W(\det(V_{obs}(\cdot)))$ ne dépend que de P et non du transport choisi, transport par lequel on a obtenu $V_{obs}(\cdot)$. Ainsi, le fait de pouvoir contruire ou non une frame périodique pour P ne dépend en réalité que de P .

Etape 4 : à l'étape 3, on a obtenu une contraction $\tilde{V} : (k_1, t) \in [0, 1]^2 \rightarrow \tilde{V}(k_1, t) \in \mathcal{U}_m$ de $V_{obs}(\cdot)$ sur \mathbb{I}_m . On définit alors la frame suivante :

$$\forall (k_1, k_2) \in [0, 1]^2, \quad \tilde{U}(k_1, k_2) = U(k_1, k_2) \tilde{V}(k_1, k_2).$$

\tilde{U} est bien continue par construction. De plus, $\tilde{U}(k_1, 0) = U(k_1, 0) \tilde{V}(k_1, 0) = U(k_1, 0) V_{obs}(k_1) = U(k_1, 1) = U(k_1, 1) \mathbb{I}_m = \tilde{U}(k_1, 1)$. On a ainsi obtenu une frame périodique pour $P(k_1, k_2)$.

Exemple 3.6. Cette démonstration permet d'expliquer assez simplement le "Dirac's string trick" : dans l'espace, une rotation de 2π ne permet pas toujours de revenir à sa position d'origine alors qu'une rotation de 4π le permet. Les rotations dans \mathbb{R}^3 correspondent par des matrices de SO_3 . Par le processus de contraction décrit dans la démonstration précédente

(étape3), chaque fonction de la forme $M : \theta \in [0, 1] \rightarrow M(\theta) \in \mathcal{SO}_3$ peut être contractée continuellement sur une matrice de la forme :

$$\tilde{M}(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos(2k\pi\theta) & -\sin(2k\theta) \\ 0 & \sin(2k\theta) & \cos(2k\pi\theta) \end{pmatrix} \quad \text{où } k \in \mathbb{Z}.$$

Les trois vecteurs colonnes m_1, m_2 et m_3 de \tilde{M} sont orthogonaux. Il suffit donc de connaître deux de ces trois vecteurs, par exemple m_1 et m_2 , pour connaître le troisième, grâce au produit vectoriel. Les vecteurs m_1 et m_2 sont des vecteurs de \mathbb{S}^2 . Si on les représente sur une sphère, m_1 est fixe tandis que m_2 fait k tours lorsque θ varie entre 0 et 1.

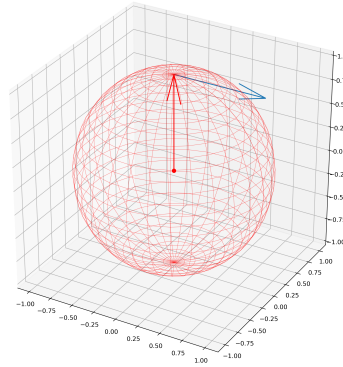


FIGURE 6 – Les vecteurs m_1 (en rouge) et m_2 (en bleu, pour $\theta = 0$).

On peut passer par homotopie de la figure 6 à la figure suivante :

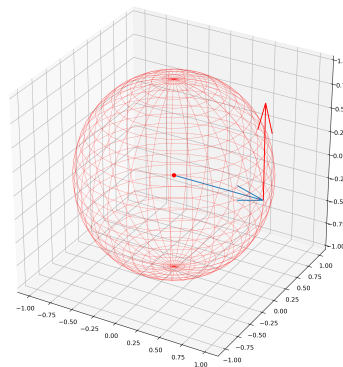


FIGURE 7 – Les vecteurs m_1 (en rouge) et m_2 (en bleu, pour $\theta = 0$) après homotopie.

Sur cette figure, m_2 (le vecteur bleu) fait k tours dans le plan $z = 0$ lorsque θ varie entre 0 et 1. On peut déformer continuellement le mouvement pour que m_2 décrive k boucles de \mathbb{S}^3 lorsque θ varie entre 0 et 1. On peut ensuite montrer que si k est pair, les vecteurs m_1

et m_2 ont la même position pour $\theta = 0$ et $\theta = 1$. Autrement dit, on a la relation suivante :

$$\pi_1(\mathcal{SO}_3) \subset \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$$

où $\pi_1(\mathcal{SO}_3)$ est le groupe fondamental de \mathcal{SO}_3 , c'est-à-dire l'ensemble des classes d'homotopie de boucles de \mathcal{SO}_3 . On peut en fait montrer qu'il y a égalité :

$$\pi_1(\mathcal{SO}_3) = \mathbb{Z}/2\mathbb{Z}.$$

3.3 Construction d'une frame périodique en dimension $n \geq 3$

On peut maintenant se demander si la méthode de construction d'une frame périodique que nous venons de voir peut se généraliser à une famille de projecteurs $P(t) \in \mathcal{M}_d(\mathbb{C})$ de rang $m \leq d$ où t appartient à $[0, 1]^n$ avec $n \geq 3$ et P périodique.

3.3.1 Le cas $n=3$

Théorème 3.7. *Il existe une frame pour P si et seulement si pour tout (k_1, k_2, k_3) dans $[0, 1]^3$:*

$$Ch(P(k_1, \dots, \cdot), \mathbb{T}^2) = Ch(P(\cdot, k_2, \cdot), \mathbb{T}^2) = Ch(P(\cdot, \cdot, k_3), \mathbb{T}^2) = 0.$$

Démonstration. On donne ici les grandes lignes de la démonstration.

On fixe $k_3 = 0$ et on construit une frame périodique pour $(k_1, k_2) \in [0, 1]^2 \rightarrow P(k_1, k_2, 0)$. D'après ce qu'on a vu dans la section précédente pour le cas $n = 2$, cette frame existe car $Ch(P(\cdot, \cdot, k_3), \mathbb{T}^2) = 0$.

On utilise ensuite le transport parallèle pour obtenir une frame $U(k_1, k_2, k_3)$. Cette frame n'est pas forcément périodique. Il existe $V_{obs} : (k_1, k_2) \in [0, 1]^2 \rightarrow V_{obs}(k_1, k_2) \in \mathcal{U}_m$ telle que :

$$\forall (k_1, k_2) \in [0, 1]^2, \quad U(k_1, k_2, 1) = U(k_1, k_2, 0)V_{obs}(k_1, k_2).$$

De plus, on a $V_{obs}(0, k_2) = V_{obs}(1, k_2)$ et $V_{obs}(k_1, 0) = V_{obs}(k_1, 1)$.

Pour (k_1, k_2) dans $[0, 1]^2$, on écrit $V_{obs}(k_1, k_2)$ sous la forme :

$$V_{obs}(k_1, k_2) = \begin{pmatrix} \vdots & & \vdots \\ v_1(k_1, k_2) & \dots & v_m(k_1, k_2) \\ \vdots & & \vdots \end{pmatrix}$$

où les $v_j(k_1, k_2)$ sont orthogonaux et de norme 1. On va chercher à contracter $V_{obs}(\cdot, \cdot)$ sur \mathbb{I}_m .

Comme pour le cas $n = 2$, on contracte par récurrence les colonnes. On commence par $v_1(k_1, k_2)$. En tant que vecteur dans \mathbb{R} , $v_1(k_1, k_2)$ appartient à \mathbb{S}^{2m-1} . On peut donc contracter $v_1(k_1, k_2)$ sur le vecteur dont toutes les coordonnées sont nulles sauf la première qui vaut 1 si et seulement si $2m - 1 > 1$, c'est-à-dire si et seulement si $m > 1$. En effet, pour $m > 1$, contracter une fonction de $[0, 1]^2$ dans \mathbb{S}^{2m-1} sur un vecteur de \mathbb{S}^{2m-1} est similaire au cas traité en 1.2. Cela repose sur le fait que pour $m > 1$, on ne peut pas recouvrir \mathbb{S}^{2m-1} par une surface de dimension 2.

On peut ainsi contracter les vecteurs colonnes de $V_{obs}(k_1, k_2)$ un par un, jusqu'à l'avant dernier. En utilisant le transport parallèle avec des projecteurs bien choisis, l'orthonormalité des vecteurs colonnes est conservée et on obtient finalement une matrice de la forme :

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & & \\ \vdots & & \ddots & \\ 0 & & & \exp(i\phi(k_1, k_2)) \end{pmatrix}.$$

Par périodicité, il existe $m_1, m_2 \in \mathbb{Z}$ tels que pour tout k_2 dans $[0, 1]$, $\phi(0, k_2) = \phi(1, k_2) + 2\pi m_1$ et pour tout k_1 dans $[0, 1]$, $\phi(k_1, 0) = \phi(k_1, 1) + 2\pi m_2$. De plus, comme dans le cas $n = 2$, on peut montrer que :

$$\forall k_2 \in [0, 1], \quad m_1 = W(\det V_{obs}(\cdot, k_2)) = Ch(P(\cdot, k_2, \cdot), \mathbb{T}^2)$$

$$\forall k_1 \in [0, 1], \quad m_2 = W(\det V_{obs}(k_1, \cdot)) = Ch(P(k_1, \cdot, \cdot), \mathbb{T}^2).$$

Ainsi, la fonction $(k_1, k_2) \in [0, 1]^2 \rightarrow \exp(i\phi(k_1, k_2))$ se contracte sur le point $1 \in \mathbb{C}$ si et seulement si $Ch(P(\cdot, k_2, \cdot), \mathbb{T}^2) = Ch(P(k_1, \cdot, \cdot), \mathbb{T}^2) = 0$.

On a donc obtenu une contraction \tilde{V} de $V_{obs}(\cdot, \cdot)$ sur \mathbb{I}_m . On définit alors la frame suivante :

$$\forall (k_1, k_2, k_3) \in [0, 1]^3, \quad \tilde{U}(k_1, k_2, k_3) = U(k_1, k_2, k_3)\tilde{V}(k_1, k_2, k_3).$$

Par construction, \tilde{U} est bien continue. De plus, $\tilde{U}(k_1, k_2, 0) = U(k_1, k_2, 0)\tilde{V}(k_1, k_2, 0) = U(k_1, k_2, 0)V_{obs}(k_1, k_2) = U(k_1, k_2, 1) = U(k_1, k_2, 1)\mathbb{I}_m = \tilde{U}(k_1, k_2, 1)$. Donc \tilde{U} est bien une frame périodique pour P . \square

3.3.2 Le cas de $n \geq 4$

A partir de $n \geq 4$, il n'est plus possible d'utiliser le même procédé de construction. On peut certes commencer à contruire une frame sur l'axe $k_4 = 0$ en se basant sur le raisonnement fait pour $n = 3$. Dans le cas où les nombres de Chern correspondant sont nuls, on obtient alors une frame $U(k_1, k_2, k_3, 0)$. On utilise le transport parallèle pour transporter cette frame le long de l'axe k_4 . La frame obtenue n'est pas forcément périodique. Il existe $V_{obs} : (k_1, k_2, k_3) \in [0, 1]^3 \rightarrow V_{obs}(k_1, k_2, k_3) \in \mathcal{U}_m$ telle que :

$$\forall (k_1, k_2, k_3) \in [0, 1]^3, \quad U(k_1, k_2, k_3, 1) = U(k_1, k_2, k_3, 0)V_{obs}(k_1, k_2, k_3).$$

Pour (k_1, k_2, k_3) dans $[0, 1]^3$, on écrit $V_{obs}(k_1, k_2, k_3)$ sous la forme :

$$V_{obs}(k_1, k_2, k_3) = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots \\ v_1(k_1, k_2, k_3) & \dots & v_m(k_1, k_2, k_3) \\ \vdots & \vdots \end{pmatrix}$$

où les $v_j(k_1, k_2, k_3)$ sont orthogonaux et de norme 1.

En tant que vecteurs de \mathbb{R} , les v_j appartiennent à \mathbb{S}^{2m-1} . Cependant, si on cherche à appliquer à ces vecteurs la même procédure de contraction par récurrence que dans les cas $n = 2$ et $n = 3$, il y a un problème à partir de $m = 2$. En effet, il s'agit alors de contracter dans \mathbb{S}^3 une fonction allant de $[0, 1]^3$ dans \mathbb{S}^3 sur le vecteur $(1, 0, 0, 0)$ de \mathbb{S}^3 , ce que pour l'instant on ne sait pas faire de manière algorithmique (sauf peut-être un spécialiste du domaine à l'ETHZ).

Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons donc présenté des méthodes algorithmiques fondées sur le transport parallèle permettant de construire des homotopies dans \mathcal{U}_m . Ces méthodes, relativement faciles à implémenter, rendent possible la systématisation de la construction d'une frame pour une famille de projecteurs, problème important en physique quantique. Néanmoins, elles sont loin d'être généralisables : pour des projecteurs dépendant de quatre variables ou plus, le problème de la construction algorithmique d'une frame reste ouvert. Une des pistes possibles, mais non explorée dans ce mémoire, pourrait être la théorie de l'homologie.

Annexe

Retour sur la remarque 3.5

On donne ici une démonstration de l'égalité donnée dans la remarque 3.5. On pose $U_+ := \tilde{U}^*(., 1)$ et $U_- := \tilde{U}^*(., 0)$. On a :

$$V_{obs}(k_1) = U_-^*(k_1)U_+(k_1), \quad \text{d'où} \quad \partial_{k_1}V_{obs} = (\partial_{k_1}U_-^*)U_+ + U_-^*\partial_{k_1}(U_+).$$

Dans le calcul de $W(\det V_{obs})$, cela donne :

$$\begin{aligned} W(\det V_{obs}) &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \frac{1}{\det V_{obs}} \partial_{k_1}(\det V_{obs}) dk_1 \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \frac{1}{\det V_{obs}} \det V_{obs} \text{Tr}(V_{obs}^* \partial_{k_1} V_{obs}) dk_1 \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \text{Tr}(V_{obs}^* \partial_{k_1} V_{obs}) dk_1. \end{aligned}$$

Comme $U_+U_+^* = U_-U_-^* = P$, on a alors :

$$\begin{aligned} W(\det V_{obs}) &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \text{Tr}(U_- (\partial_{k_1} U_-^*)) dk_1 + \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \text{Tr}(U_+^* (\partial_{k_1} U_+)) dk_1 \\ &= \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \text{Tr}(U_+^* (\partial_{k_1} U_+) - U_-^* (\partial_{k_1} U_-)) dk_1. \end{aligned}$$

On écrit $U_+^* (\partial_{k_1} U_+)$ sous la forme :

$$U_+^* (\partial_{k_1} U_+)(k_1) = U_-^* (\partial_{k_1} U_-)(k_1) + \int_0^1 \partial_{k_2}(\tilde{U}^*(k_1, k_2)) \partial_{k_2} \tilde{U}(k_1, k_2) dk_2.$$

On obtient ainsi, en intégrant par partie selon k_1 :

$$W(\det V_{obs}) = \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \text{Tr}(\partial_{k_2}(\tilde{U}^* \partial_{k_1} \tilde{U})) dk_1 dk_2 = \frac{1}{2\pi i} \int_0^1 \text{Tr}([\partial_{k_1} \tilde{U}, \partial_{k_2} \tilde{U}^*]) dk_1 dk_2.$$

Par ailleurs, la courbure de Berry de P est définie par $\mathcal{F}[P] := -i\text{Tr}(P[\partial_{k_1}P, \partial_{k_2}P])$. Comme $P = \tilde{U}\tilde{U}^*$ et $\tilde{U}^*\tilde{U} = \mathbb{I}_m$, on a :

$$\begin{aligned} \text{Tr}(P\partial_{k_1}P\partial_{k_2}P) &= \text{Tr}(\tilde{U}\tilde{U}^* [(\partial_{k_1}\tilde{U})\tilde{U}^* + \tilde{U}(\partial_{k_1}\tilde{U}^*)] [(\partial_{k_2}\tilde{U})\tilde{U}^* + \tilde{U}(\partial_{k_2}\tilde{U}^*)]) \\ &= \text{Tr}(\tilde{U}^*(\partial_{k_1}\tilde{U})\tilde{U}^*(\partial_{k_2}\tilde{U})) + \text{Tr}(\tilde{U}\tilde{U}^*(\partial_{k_1}\tilde{U})(\partial_{k_2}\tilde{U}^*)) + \text{Tr}((\partial_{k_1}\tilde{U}^*)(\partial_{k_2}\tilde{U})) \\ &\quad + \text{Tr}(\tilde{U}(\partial_{k_1}\tilde{U}^*)\tilde{U}(\partial_{k_2}\tilde{U}^*)). \end{aligned}$$

En soustrayant et en utilisant la cyclicité de la trace, on obtient :

$$\mathcal{F}[P] = -i\text{Tr}(\tilde{U}\tilde{U}^* [(\partial_{k_1}\tilde{U}), (\partial_{k_2}\tilde{U}^*)]).$$

En différentiant l'égalité $\tilde{U}^*\tilde{U} = \mathbb{I}_m$, on obtient $\tilde{U}^*\partial_{k_i}\tilde{U} = -(\partial_{k_i}\tilde{U}^*)\tilde{U}$. L'expression précédente devient alors :

$$\mathcal{F}[P] = -i\text{Tr}([\partial_{k_1}\tilde{U}, \partial_{k_2}\tilde{U}^*]).$$

En reprenant l'expression de $W(\det V_{obs})$, on obtient :

$$W(\det V_{obs}) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} \text{Tr}([\partial_{k_1}P, \partial_{k_2}P])$$

$$\text{où } \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} \text{Tr}([\partial_{k_1}P, \partial_{k_2}P]) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{T}^2} \text{Tr}(PdP \wedge dP) = \text{Ch}(P, \mathbb{T}^2).$$

Références

- [1] Mikio Nakahara, *Geometry, topology and physics*, Taylor & Francis, 2003
- [2] David Gontier, Antoine Levitt et Sami Siraj-Dine, "Numerical construction of Wannier functions through homotopy", *J. Math. Phys.*, p.60, 031901, 2019
- [3] Horia Cornean, David Gontier, Antoine Levitt et Domenico Monaco, "Localised Wannier functions in metallic systems", *Ann. Henri Poincaré*, 2019

Remerciements

Je remercie chaleureusement David Gontier pour tout le temps qu'il m'a consacré. Sa bonne humeur inconditionnelle a égayé mes mercredis après-midi et grâce à lui, j'ai découvert une nouvelle façon de faire des mathématiques : en dessinant.